УДК 537.533

ОПТИМИЗАЦИЯ ПАРАМЕТРОВ ПЛАЗМЕННЫХ ТЕПЛООТРАЖАЮЩИХ ПОКРЫТИЙ

Д.Д. Баинов, В.П. Кривобоков, В.Н. Легостаев

НИИ ядерной физики при Томском политехническом университете
E-mail: krivobokov@npi.tpu.ru

Описан процесс оптимизации оптических свойств плазменных теплоотражающих покрытий. Расчёт построен на использовании так называемого эволюционного метода, который состоит в целенаправленном переборе компонентов покрытия с последовательным приближением к глобальному экстремуму по законам биологического сообщества. Он позволяет существенно сократить трудоёмкость процесса оптимизации. Показано, что для достижения высоких коэффициентов пропускания теплоотражающих покрытий выгодно (для улучшения качества просветления) разделить один слой серебра на два с прослойкой просветляющих оксидных плёнок между ними. Это несколько усложняет технологию осаждения теплоотражающих покрытий, но улучшает их функциональные характеристики. Приведены данные по пропусканию и отражению рассмотренных покрытий.

Введение

Известно, что в тепловом балансе жилых зданий и промышленных объектов до 40 % потерь приходится на утечку тепла через прозрачные ограждения (окна, балконы, витрины и т.д.) [1]. При этом доля радиационной компоненты составляет примерно 2/3 этих потерь, и только 1/3 приходится на теплопроводность.

Максимум теплового излучения жилого помещения при 20 °C находится в инфракрасной (ИК) об-

ласти на длине волны 10 мкм [2]. Теплоотражающее покрытие (ТОП) отражая более 90 % ИК излучения, хорошо пропускает видимый свет. Нанесение на поверхность стекла ТОП позволяет снизить потери на излучение в 2...3 раза по сравнению с обычным стеклом, вследствие уменьшения коэффициента эмиссии в 10...20 раз. Уменьшая потери тепла из здания в зимнее время, такие стекла ограничивают его нежелательный приток внутрь помещения летом, благодаря чему снижаются потери энергии на кондиционирование воздуха и вентиляцию.

Раньше задача об оптимальных по материальным и геометрическим параметрам ТОП на листовом архитектурном стекле не вызывала большого практического интереса из-за того, что не существовало технологий их равномерного нанесения на большие поверхности. Сегодня ситуация существенно иная. Благодаря большим успехам в развитии плазменных методов обработки материалов эта проблема в общих чертах решена. Но эффективность подобных покрытий и их потребительские свойства во многом зависят от того, насколько правильно выбраны материал каждого из слоёв, их последовательное расположение и толщина.

Цель настоящей работы – изложить методику оптимизации оптических свойств ТОП на основе эволюционного алгоритма, широко распространённого в моделировании динамики развития биологических сообществ.

В данной статье однослойные образования на подложке мы будем называть плёнками, многослойные – покрытиями.

Теплоотражающие покрытия как объект оптимизации

Современные ТОП содержат тонкую полупрозрачную плёнку металла, обладающую большим коэффициентом отражения в ИК области (обычно это серебро), и слои диэлектриков, чаще всего оксидов металлов, для просветления в видимой области спектра.

Плёнка серебра заключается между тонкими (толщиной порядка 1 нм) барьерными слоями из коррозионно-стойкого металла или сплава. Основная задача их состоит в том, чтобы защитить серебряную плёнку от воздействия химически активных ионов кислорода, которые присутствуют в плазме при осаждении просветляющих (оксидных) слоёв, входящих в состав ТОП. Барьерные слои с одной стороны должны быть как можно тоньше, чтобы не очень сильно снижать пропускание видимого света. Но с другой стороны они должны быть достаточно плотными, чтобы защитить плёнку серебра.

Практически все технологии нанесения ТОП на поверхность листового стекла построены на использовании магнетронных распылительных систем. Главными критериями качества стекла с ТОП являются его сопротивление тепловому потоку (чем больше отражением в ИК области, тем больше сопротивление тепловому потоку) и коэффициент пропускания света в видимой области.

Такое стекло обычно используют в составе стеклопакета покрытием внутрь. Это обеспечивает сохранность ТОП от механических воздействий и препятствует конденсации атмосферной влаги на покрытии, а также снижает потери тепла за счет теплопроводности.

Оптимизация ТОП заключается в варьировании толщины просветляющих слоев до достижения максимального пропускания в видимой области спектра при условии, что сопротивление тепловому потоку ТОП удовлетворяет требованиям стандарта. При этом наибольшее значение толщины просветляющих слоев задаётся так, чтобы процесс интерференции не перешел в ИК область.

Критерием качества ТОП является оценочная функция f, которая вычисляется по видимому диапазону спектра как сумма квадратов разностей заданной и расчетной величин пропускания и/или отражения:

$$f=\sum_{i=1}^{M}(1-(T_{0_i}-T(\lambda_i))^2-(R_{0_i}-R(\lambda_i))^2), \qquad (1)$$

где T_0, R_0 – заданные и T, R – расчетные величины коэффициентов пропускания и отражения ТОП; λ – длина волны падающего излучения; M – число точек расчета.

Необходимо отметить, что ТОП – это многослойная структура, и величины T и R зависят также от толщины h и вида материала каждого слоя.

Стекло с простым ТОП представляет собой комбинацию слоёв: стекло (h=4...6 мм)/TiO_2(20...40 нм) /Ag(9...13 нм)/Ni–Cr(~1 нм)/TiO_2(20...40 нм). Изменяя методом последовательных приближений значения толщин верхнего и нижнего слоев TiO_2 (толщина плёнки серебра берётся постоянной), можно добиться коэффициента пропускания видимого света на уровне 84...90 %. В этом случае оценочная функция зависит от двух переменных и имеет один экстремум [3, 4].

По указанному выше способу нами была проведена оптимизация ТОП вида TiO_2/Ag(11 нм)/TiO_2. В результате измерений сопротивление тепловому потоку однокамерного стеклопакета, содержащего стекло с таким ТОП, оказалось равным 0,60 °С·Вт/м^2, в то время как по требованию стандарта (СНиП II-3-79 "Строительная теплотехника") оно должно быть не ниже 0,56 °С·Вт/м^2 [1]. При этом интегральное пропускание видимого света составило 86 % (пропускание стекла без ТОП ~90 %).

Что надо сделать, если потребуется дополнительно увеличить сопротивление тепловому потоку в результате, например, ужесточения стандарта? Большое сопротивление тепловому потоку может быть достигнуто простым увеличением толщины слоя металлической плёнки. Но это приводит к дополнительным трудностям. Например, при увеличении толщины слоя металла для обеспечения пропуска-

ния на указанном выше уровне следует использовать слои оксидов с еще более высокими показателями преломления, что очень трудно выполнить на практике. В этом случае один такой слой моделируют системой чередующихся слоев оксидов с большим и малым показателями преломления (например, TiO_2 и Al_2O_3), а оценочная функция начинает зависеть от трех и более переменных (толщин слоев). Она становится многоэкстремальной, и процесс оптимизации последовательным приближением останавливается в первом локальном экстремуме функции, не достигая глобального экстремума.

Возникает необходимость использования метода, который бы рассматривал все или большинство возможных комбинаций толщин просветляющих слоев. Другими словами, задача ставится так: как, по какому алгоритму нужно менять значения толщины просветляющих слоев в той или иной композиции ТОП, чтобы добиться максимального эффекта просветления?

Для её решения (при практически полном отсутствии предположений о характере исследуемой функции) применяется так называемый эволюционный метод поиска, впервые предложенный Дж. Холландом [5]. Основные положения его изложены ниже.

Сущность эволюционного метода

Работа эволюционного метода оптимизации представляет собой итерационный процесс, схема которого приведена на рис. 1. Здесь в качестве объекта оптимизации выступает индивид – ТОП заданной композиции на стекле.

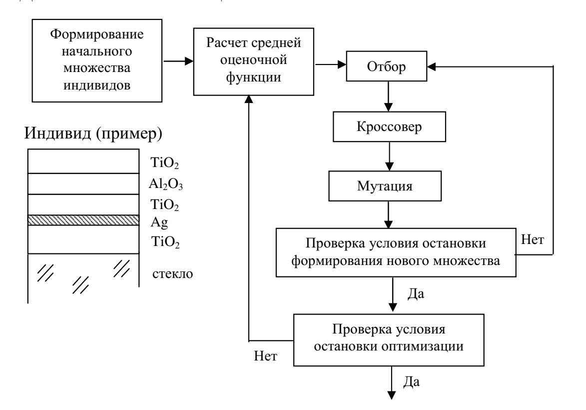


Рис. 1. *Схема эволюционного метода оптимизации*

Вначале формируется некое множество индивидов со случайно заданными значениями толщин просветляющих слоев. Рассчитывается средняя оценочная функция:

$$f_a = \sum_{i=1}^{N} f_i \Big/ N, \qquad (2)$$

где N – число индивидов.

Затем с помощью оператора отбора из этого множества выбираются два индивида, у которых значения оценочных функции большие, чем среднее по множеству. Выбранные индивиды подвергаются действию операторов кроссовера и мутации.

Кроссовер послойно (за исключением плёнки серебра), по определенному правилу меняет значения толщин слоев этих индивидов. Правилом может быть некая формула (для десятичных цифр) или изменение некоторых разрядов (для двоичных цифр). Оператор мутации воздействует на значение толщины одного из слоев покрытия. Он призван скачкообразно изменить оценочную функцию индивида в лучшую или худшую (в смысле оптимизации) сторону. Слишком частое действие оператора мутации приводит к постоянным скачкообразным изменениям значений оценочной функции. В результате средняя оценочная функция ведет себя непредсказуемо и процесс оптимизации прекращается. Поэтому действие оператора мутации имеет малую вероятность.

Новое множество формируется, например, до тех пор, пока число индивидов в нем не будет равно числу индивидов в предыдущем. Далее предыдущее множество заменяют новым. При этом рассчитывается новая средняя оценочная функция и т.д.

Таким образом, средняя оценочная функция, увеличивая от итерации к итерации свое значение, задает направление изменения толщин просветляющих слоев. В результате по истечению заданного количества итераций остается множество индивидов с толщиной просветляющих слоев, значение которой близко к толщине, соответствующей глобальному экстремуму оценочной функции.

Время счёта по алгоритму эволюционного метода зависит от параметров и вида операторов отбора, кроссовера и мутации, условий формирования нового множества, числа индивидов в множестве, типа композиции индивида, точности расчета его оценочной функции что достигается увеличением числа точек расчёта M, см. формулу (1), условий остановки процесса оптимизации.

Модель пропускания и отражения одно- и многослойной тонкой пленки

Как видно из формулы (1), определение оценочной функции основано на расчете T и R. При вычислении этих величин использовались выражения Френеля [6] для плоской изотропной пленки, толщина которой соизмерима с длиной волны падающего света, обладающей показателем преломления n_2 и коэффициентом поглощения k_2 (см. рис. 2, *а*, здесь параметры n_1, k_1, n_3, k_3 характеризуют две полубесконечные среды по обе стороны пленки). Для простоты угол падения света принят нормальным.

Обозначим $\beta=(2\pi/\lambda)h(n_2+ik_2)$ и составим ряд для прошедшей через пленку и отраженной от пленки компонент падающей волны. Как видно из рис. 2, *а*, каждый ряд представляет собой бесконечную геометрическую прогрессию, членами которого являются произведения коэффициентов Френеля r_{12}, r_{23}, t_{12}, t_{23} для границ раздела сред. Найдя сумму каждого ряда, получим коэффициенты отражения и пропускания пленки: $r_{13} = \dfrac{r_{12} + r_{23}e^{i2\beta}}{1 + r_{12}r_{23}e^{i2\beta}}$; $t_{13} = \dfrac{r_{12} + r_{23}e^{i\beta}}{1 + r_{12}r_{23}e^{i2\beta}}$.

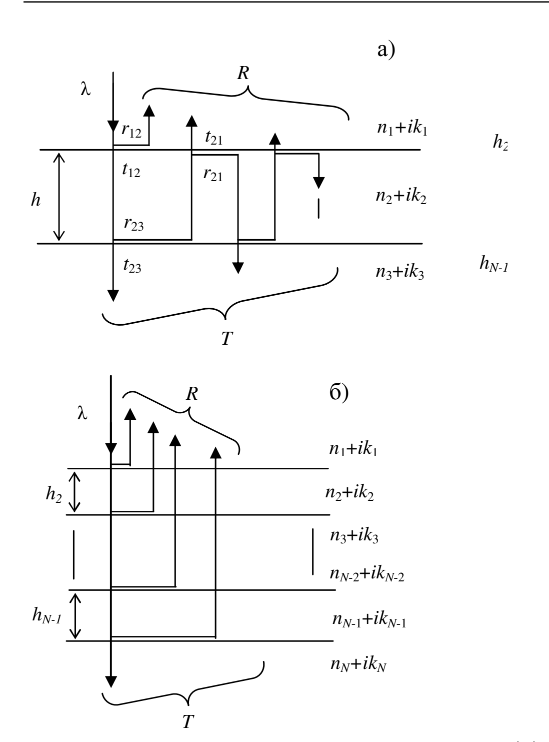


Рис. 2. *Оптическая модель однослойной плёнки (а) и многослойного покрытия (б)*

Величины амплитуд и фаз φ определяются следующим образом: $R=|r_{13}|^2$, $T=\frac{|n_3+ik_3|}{|n_1+ik_1|}|t_{13}|^2$,

$\mathrm{tg}(\varphi_R)=\frac{\mathrm{Im}(r_{13})}{\mathrm{Re}(r_{13})}, \mathrm{tg}(\varphi_T)=\frac{\mathrm{Im}(t_{13})}{\mathrm{Re}(t_{13})}$. Фазы вычисляются в соответствии со знаками числителя и знаменателя.

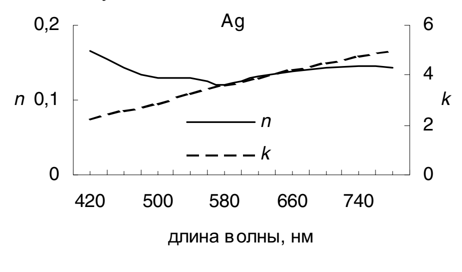
Если на поверхности подложки имеется многослойное покрытие (см. рис. 2, *б*), то расчет удобно начинать с нижней плёнки. Вычисление коэффициентов r_{13} и t_{13} производится аналогично случаю однослойной пленки, находящейся между двумя средами. Затем поверхность с пленкой заменяется некой эффективной поверхностью, характеризуемой рассчитанными коэффициентами, играющими роль френелевских коэффициентов r_{23}, t_{23}.

Этот прием повторяется до тех пор, пока не будет добавлен последний (самый верхний) слой покрытия [7].

Особенностью стеклянной подложки является её очень большая по сравнению с покрытием толщина (4 мм). При попытке рассчитать для данного случая пропускание и отражение имеет место значительное искажение результатов вследствие влияния многолучевой интерференции. Поэтому для подложки указанные параметры вычислялись без учета интерференции.

Проектирование теплоотражающих покрытий. Результаты расчётов

Рассмотрим ТОП на основе серебра и оксидов титана, алюминия и олова. Оптические константы оксидов и стеклянной подложки были рассчитаны нами, константы для серебра взяты из работы [8]. На рис. 3 показана дисперсия оптических констант этих материалов в видимой области. Все они, кроме серебра, в расчётах приняты как не поглощающие излучение свет в видимой области спектра.



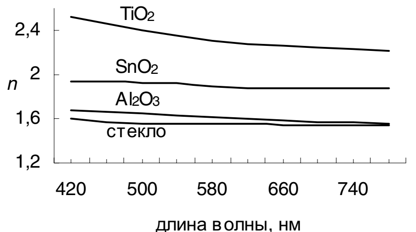


Рис. 3. *Оптические константы материалов слоев ТОП*

На рис. 4 приведена расчетная зависимость интегрального коэффициента пропускания видимого света серебряной пленкой от ее толщины. Видно что, по мере увеличения толщины плёнки от 10 до 50 нм он падает в 20 раз и составляет всего 3 %. Поэтому просветление относительно плотной пленки представляет собой самостоятельную весьма сложную задачу. В данной работе она не будет рассматриваться.

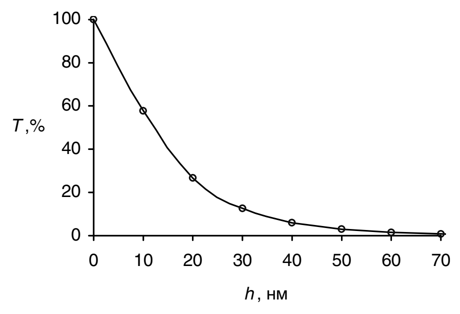


Рис. 4. *Зависимость интегрального коэффициента пропускания видимого света серебряной пленки от ее толщины*

Теперь попробуем просветлить слой серебра толщиной 20 нм. При этом потребуем, чтобы коэффициент пропускания стекла с ТОП, содержащим такой слой, в видимой области спектра был бы на уровне стекла без каких-либо покрытий (~90 %).

Зададим T_0 = 100 % и R_0 = 0 %. Толщина плёнки серебра в процессе расчета меняться не будет. Значения толщины слоёв оксидов будем изменять в интервале 5...63 нм. Условием остановки процесса оптимизации сделаем достижение определенного количества итераций, причем число индивидов в множестве будет оставаться фиксированным.

Процедура отбора эволюционного метода в нашем случае построена на принципе элитарности. В соответствии с ним лучшие индивиды без каких-

либо условий переходят в следующее множество. Таким образом, исключается потеря оптимальных значений толщин просветляющих слоев при переходе от множества к множеству.

В результате расчётов получена структура 1, схематично изображённая на рис. 5. Её коэффициенты пропускания и отражения в видимой области приведены на рис. 6. Высокая степень прозрачности (на уровне чистого стекла) достигнута лишь в области длин волн 500...600 нм. За её пределами коэффициент пропускания весьма мал.

Дальнейшие поиски не привели к улучшению этих характеристик. Вначале, с увеличением количества просветляющих слоев, они остаются на уровне *R* и *T* структуры 1, а затем ухудшаются.

Поэтому мы предприняли попытку разделить 20 нм слой серебра пополам (*double*-структура). Расчёты показали, что это приводит к совершенно новому результату. При определенных комбинациях геометрических и материальных параметров слоёв (см. структуры 2 и 3 на рис. 5) наблюдается заметное увеличение коэффициента пропускания и практически полное отсутствие отражения в области длин волн 450...750 нм (см. рис. 6).

Оптимизация при дальнейшем увеличении количества просветляющих слоев не даёт заметного преимущества перед структурами 2 и 3.

Важным обстоятельством является то, что коэффициент отражения ТОП в ИК области практически не меняется при переходе от структуры с одним слоем серебра (20 нм) к структуре двумя слоями (10+10 нм) и составляет ~94 %.

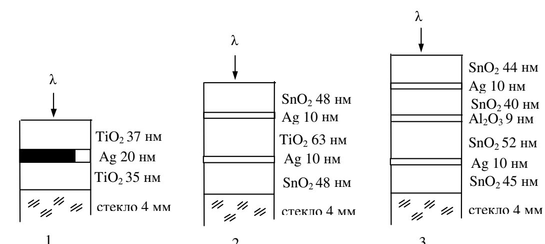


Рис. 5. *Варианты структуры ТОП*

Несколько слов о технологических аспектах проблемы ТОП. Наши расчёты выполнены в предположении, что просветляющий слой выполнен из диоксида титана или системы $SnO_2/Al_2O_3/SnO_2$. Объективно, по своим оптическим свойствам, TiO_2 способен обеспечить более высокое качество просветления. Но скорость осаждения SnO_2 в магнетронных диодах на постоянном токе в 5...10 раз выше. Это обстоятельство может быть решающим при выборе технологической схемы.

Необходимо помнить и о барьерных слоях, функциональное назначение которых – защитить серебряную плёнку от воздействия плазмы, содержащей ионы кислорода. Чтобы предотвратить влияние барьерных слоев на оптические свойства ТОП, они наносятся с минимальной толщиной. Поэтому их не учитывали в процессе оптимизации. На первый взгляд, видимо, достаточно наносить их с одной стороны слоя серебра (с той, которая подвергается воздействию ионов кислорода плазмы). Но имеет место фактор диффузии серебра в соседние слои, вызывающей деградацию плёнки. Его тоже надо принимать во внимание.

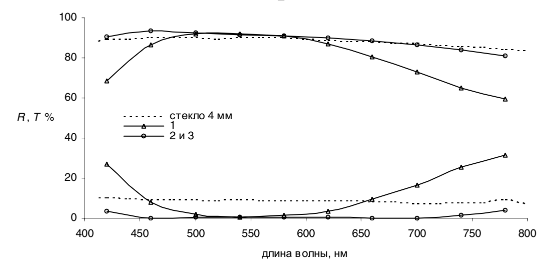


Рис. 6. *Коэффициенты пропускания и отражения различных структур ТОП (рис. 5) и чистого стекла*

Заключение

1. Нами подтверждено, что эволюционный метод является эффективной процедурой оптимизации оптических свойств теплоотражающих покрытий.
2. Оптимизированы расчетным путем оптические характеристики многослойных теплоотражающих покрытий типа "оксид – серебро – оксид" на стеклянной подложке при нормальном угле падения света. Установлено, что при разделении плёнки серебра на два слоя с просветляющей оксидной прослойкой между ними ширина области высокой прозрачности в видимой части спектра увеличивается со 100 до 400 нм.
3. Коэффициент отражения подобных покрытий в диапазоне длин волн 450...750 нм в сопоставлении с исходным стеклом снижается с 10 до 1 и менее %.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Реутов Б.Ф., Слепцов В.В., Пыжов И.Н., Арбузов В.В. Энергосберегающие покрытия на стекле и полимерной пленке / Российские энергоэффективные технологии – М.: ЗАО "Фабрика офсетной печати", 2002. – Вып. 1 (4). – 48 с.
2. Гроссе П. Свободные электроны в твердых телах. – М.: Мир, 1982.
3. Grosse P., Hertling R., Müggenbeurg T. Design of low-emissivity systems based on a three-layer coating // Journal of Non-Crystalline Solids. – 1997. – V. 218. – P. 38–43.
4. Martin-Palma R. J., Vazquez L., Martinez-Duart J., Malats-Riera M. Silver-based low-emissivity coatings for architectural windows: optical and structural properties // Sol. Energy Mater. and Sol. Cells. – 1998. – V. 53. – № 1–2. – P. 55–66.
5. Holland J.H. Adaptation in Natural and Artificial Systems. Ann Arbor: The University of Michigan Press, 1975.
6. Борн М., Вольф Э. Основы оптики. – М.: Наука, 1970. – 670 с., илл.
7. Крылова Т.Н. Интерференционные покрытия. – М.: Наука, 1968. – 282 с., илл.
8. Поль Р.В. Оптика и атомная физика. – М.: Наука, 1966. – 552 с., илл.